

# 量 子 力 学

成都電訊工程学院

北 京 科 学 教 育 出 版 社

1961.7.

# 量 子 力 学

成都电讯工程学院选编

北京红山印刷厂印

开本 $787 \times 1092 \frac{1}{16}$  字数269,000

印数1-840 1961年7月印

定价: 1.35元

定价: 1.35元

## 量子力学引言

經典理論是从宏观方面总结出来的。这与宏观粒子的特性有着十分密切的关系。宏观粒子的基本特性是：

- (1) 可以辨别。
- (2) 座标与冲量同时具有确定值。
- (3) 其运动符合牛頓运动方程。

本世紀初在实践的过程中发现了許多新奇的实验，它們是

- (1) 黑体輻射。
- (2) 原子光谱。
- (3) 光电效应、康普頓效应。
- (4) 电子衍射。

当我们应用經典理論企图来解释这些問題时，遇到的是不可克服的困难。为了解决这些問題，在这些实验的基础上，逐渐由“普朗克的量子假設”、“爱因斯坦的光子假設”形成了量子力学的基础。

鉴于以上事实，經過多方面的研究，确定了微观粒子的特性——波动性。

由于微观粒子具有波动性，就使得我們不能再应用經典理論来研究微观領域內的运动問題。因之在微观領域內，必須重新建立異于經典理論的，和有系統的而能解决全部微观运动問題的新理論——这就是量子力学。

量子力学的建立，是与微观粒子的特性分不开的。总结微观粒子的特性如下：

- (1) 不可辨别——全同的。
- (2) 座标与冲量不同时具有确定的值。
- (3) 其运动符合薛定諤方程。

在經典領域內粒子的“运动状态”是用坐标与冲量的集合来描述的。在微观領域中，由于微观粒子具有波动性，就再也不能应用上述經典方法来描述其运动状态。而必須应用新的方法来描述其运动状态。在微观領域內，我們將引入新的概念——波函数，通过波函数来描述微观領域中的“量子态”。

根据上述情况，在微观領域中的物理量之間的关系是与經典領域中物理量之間的关系不同的。同时在量子力的建立过程中，我們希望量子力学的組織系統能尽量的接近經典力学。由于以上的这个原因，在量子力学中我們必須应用新的數學概念来描述微观領域中的物理量。就是这样我們引入了新的數學概念——算符，使得每一物理量与其相对应的都有一算符，該算符的平均值即表示物理量。

从微观粒子的特性——波动性、表示微观粒子量子态的波函数、表示某一物理量的算符等这些基本概念出发。我們建立了在量子領域內的运动方程——薛定諤方程。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \hat{H} \psi(x, t)$$

上式中  $\psi(x, t)$  为表示某一量子态的波函数， $\hat{H}$  为与总能量相对应的哈密頓算符。从

薛定諤方程我們能夠求得：表示某一量子态的波函數以及在該量子态中总能量的數值。

在一般情況下，薛定諤方程是很难有严格的解的。也就是說解薛定諤方程是較复杂而困难的。因之在量子力学中解薛定諤方程时常应用近似法。其中最主要的一种称为微扰理論。

在微觀領域內存着两大类微觀粒子：

(1) 第一大类——玻色子。其量子态是用对称的波函數来表示的。

(2) 第二类——費米子。其量子态是用反对称的波函數来表示的。

这两大类微觀粒子的区别在于，玻色子不遵守保里原則，而費米子則遵守保里原則。对称与反对称波函數的引入表征了微觀粒子的全同性。

量子力学的应用是极其广泛的。量子力学的建立是近代科学中一个极其重要的成就。由于量子力学的建立使得能更深入地来研究原子結構中的問題。这样量子力学的建立推动了許多科学向新的阶段发展。

总结来讲，微觀粒子与宏觀粒子是具有基本上、本質上不同的性質。微觀粒子不是宏觀粒子在体积上質量上无限的縮少。而是与宏觀粒子有着质的区别。这一点在学习量子力学的过程中是极其重要的。

# 量子力学目录

## 引言

### 第一章 量子力学的实验基础

|                      |        |
|----------------------|--------|
| § 1 绝对黑体的热辐射及普朗克假设   | ( 1 )  |
| § 2 光的量子本性           | ( 3 )  |
| § 3 原子性              | ( 7 )  |
| § 4 玻尔理论             | ( 9 )  |
| § 5 德布罗意波            | ( 12 ) |
| § 6 显示微观粒子具有波动性的一些实验 | ( 15 ) |

### 第二章 量子力学的基础

|                        |        |
|------------------------|--------|
| § 7 德布罗意波的统计解释         | ( 18 ) |
| § 8 波函数的归一化            | ( 20 ) |
| § 9 量子态的迭加原理           | ( 22 ) |
| § 10 平均值               | ( 25 ) |
| § 11 量子力学中的统计系综——量子系综  | ( 27 ) |
| § 12 测不准关系             | ( 29 ) |
| § 13 唯心论者对测不准关系的看法及其批判 | ( 35 ) |
| § 14 测量仪器的作用           | ( 36 ) |

### 第三章 力学量用算符表示

|                     |        |
|---------------------|--------|
| § 15 线性自轭算符         | ( 38 ) |
| § 16 算符的本征值及本征函数    | ( 41 ) |
| § 17 测量结果的几率        | ( 44 ) |
| § 18 各种力学量可以同时确定的条件 | ( 45 ) |
| § 19 各种力学量的算符       | ( 46 ) |

### 第四章 运动方程式

|                 |        |
|-----------------|--------|
| § 20 薛定谔波动方程    | ( 52 ) |
| § 21 定态         | ( 53 ) |
| § 22 粒子数目的守恒    | ( 55 ) |
| § 23 算符对于时间的导数  | ( 56 ) |
| § 24 量子力学中的守恒定律 | ( 58 ) |
| § 25 恩费斯脱公式     | ( 59 ) |
| § 26 从量子方程到牛顿方程 | ( 61 ) |

## 第五章 薛定諤方程的簡單应用

|      |            |        |
|------|------------|--------|
| § 27 | 势阱中的粒子     | ( 64 ) |
| § 28 | 絨振子        | ( 68 ) |
| § 29 | 势垒的透射和反射   | ( 73 ) |
| § 30 | 一定寬度的势垒    | ( 77 ) |
| § 31 | 类氢原子       | ( 80 ) |
| § 32 | 动量矩的量子化    | ( 88 ) |
| § 33 | 电子在周期場中的运动 | ( 89 ) |

## 第六章 微扰理論及其簡單应用

|      |             |         |
|------|-------------|---------|
| § 34 | 无退化时的定态微扰理論 | ( 98 )  |
| § 35 | 氢原子的基态能量    | ( 101 ) |
| § 36 | 有退化时的定态微扰理論 | ( 104 ) |
| § 37 | 氢原子的一級斯塔克效应 | ( 107 ) |
| § 38 | 量子跃迁        | ( 111 ) |
| § 39 | 散射理論——波恩近似法 | ( 115 ) |

## 第七章 表象与电子自轉

|      |               |         |
|------|---------------|---------|
| § 40 | 量子系統的态的各种表象   | ( 123 ) |
| § 41 | 在各种表象中的算符——矩陣 | ( 125 ) |
| § 42 | 矩陣的演算         | ( 129 ) |
| § 43 | 在矩陣形式下算符的平均值  | ( 131 ) |
| § 44 | 原子中电子自轉的概念    | ( 134 ) |
| § 45 | 电子的自轉算符       | ( 136 ) |
| § 46 | 自轉波函數         | ( 139 ) |

## 第八章 原子与分子結構

|      |              |         |
|------|--------------|---------|
| § 47 | 全同粒子的特性      | ( 141 ) |
| § 48 | 全同粒子的波函數     | ( 144 ) |
| § 49 | 玻色子、費米子、保里原則 | ( 145 ) |
| § 50 | 門提列夫周期表理論    | ( 148 ) |
| § 51 | 氢原子的交換能      | ( 152 ) |
| § 52 | 氢原子          | ( 156 ) |
| § 53 | 价鍵的基本概念      | ( 163 ) |

## 附 录

|     |         |         |
|-----|---------|---------|
| § 1 | 波的一般性質  | ( 168 ) |
| § 2 | 波包的基本概念 | ( 171 ) |

## 第一章 量子力学的实验基础

經典理論是从宏观規律中總結出來的，这与宏观粒子的特性，有着密切的联系。經典力学最后總結成最普适的拉格朗日方程的形式。經典电磁学最后總結成最普适的麦克斯韦方程。当我们將經典理論应用到原子結構問題上，遇到了不可克服的困难。

根据經典理論，带电微粒，当其在作加速运动时，必伴随着能量的輻射。氢原子中的电子，当其繞核旋轉时，有着向心的加速度，因之必伴随着能量的輻射。如果电子繞核旋轉是一个圓周运动。則在氢原子中，电子所具有的总能量 $\mathcal{E}$ 必为：

$$\mathcal{E} = -\frac{e^2}{2r}$$

上式中 $e$ 为电子的电荷， $r$ 为圓周运动的半徑。从此，我們將明显的看到，电子不断繞核旋轉，不断輻射能量。因之使其本身所具有的总能量，不断減少。这就意味着繞核旋轉的半徑將不断縮小。最后，电子必將与核产生碰撞，而导致整个原子的毀灭。这一理論上的結果，是完全錯誤的。电子繞核旋轉，是一个稳定状态。

在此同时，为了要解釋黑体輻射的規律，普朗克引入了“量子假設”。爱因斯坦为了解釋“光电效应”引入了“光子假設”。这样就基本上形成了“量子概念”。后来，玻尔即应用以上的“量子概念”，来解釋最简单的原子結構。在这些最简单的类氢原子問題上，得到了光輝的成就。这就指出，在研究原子結構以及其他微观領域內的問題时，不能再应用經典理論，而必須应用“量子理論”。

### § 1 絕對黑体的熱輻射及普朗克假設

如果有一物体，处于任何溫度时，对于任何波长的吸收系数皆为1。那末，这物体就称为**絕對黑体**。

現在讓我們来考虑一个由絕對黑体牆壁組成的空腔。当其被加热到某一溫度 $T$ 时，壁內原子中的电子，將作有加速度的諧振运动。此时，空腔壁將輻射一定波长範圍的电磁波。由于电磁波在腔內以有限速度傳播着，因之在空腔介質中，必儲存着一定的能量。其能量密度可由下式决定之：

$$u = \frac{1}{8\pi} (E^2 + H^2)$$

上式中， $E$ 为空腔介質中的电场强度， $H$ 为空腔介質中的磁场强度。

在輻射的同时，空腔壁亦將吸收儲存在空腔中的能量。当在一定溫度时，在单位時間內，由单位面积腔壁輻射的能量等于其吸收的能量时，称为**平衡輻射**。在平衡輻射时，在单位時間內，由单位面积腔壁所輻射的，在頻率範圍 $\nu$ 到 $\nu + d\nu$ 內的能量 $du_\nu$ ，必將正比于該頻率間隔 $d\nu$ 。因之我們有

$$du_\nu = \rho_\nu d\nu \quad (1-1)$$

(1-1)式中的 $\rho_\nu$ 称为**光譜密度**。它表示在单位時間內，由单位面积腔壁，在頻率 $\nu$ 附近，在单位頻率間隔內所輻射的能量。

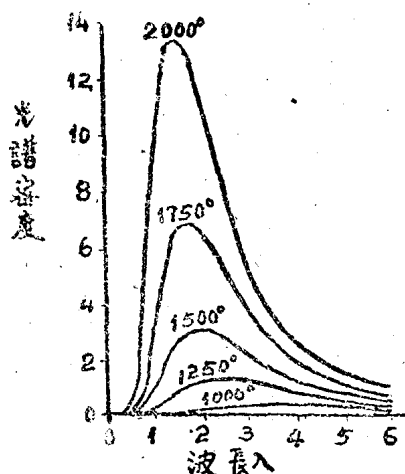


图1-1 绝对黑体 $\rho\nu \sim \lambda$ 曲线

在一定温度 $T$ 时，光谱密度 $\rho\nu$ 与波长 $\lambda$ 的关系，如图1-1所示。从实验中我们得知， $\rho\nu$ 与温度 $T$ 及频率 $\nu$ 有关。因之

$$\rho\nu = \rho\nu(T, \nu) \quad (1-2)$$

想要完全根据经典理论，得出光谱密度 $\rho\nu(T, \nu)$ 这一函数的数学形式，是不可能的。

约在1900年，对表示绝对黑体辐射规律的(1-1)式，普朗克找到一个开始时是纯粹经验的公式：

$$\rho\nu d\nu = \frac{8\pi h\nu^3}{e^3} \cdot \frac{1}{e^{K h\nu/KT} - 1} d\nu \quad (1-3)$$

这个公式与实验的数据相符合。以后，为了从理论上推导出，与实验结果相符合的，表示绝对黑体辐射规律的(1-3)式。普朗克作了如下的假设：

腔壁内作谐振运动的电子，简称线振子。这些线振子，只能处于某些特定的状态，在这些特定的状态中，它们的能量，必为最小能量 $\epsilon_0$ 的整数倍数。亦即

$$\epsilon_0, 2\epsilon_0, 3\epsilon_0, \dots, n\epsilon_0 \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

在辐射或吸收的过程中，线振子从这些状态之一，过渡到其他状态，飞跃的跨过中间的那些状态。(跃迁)

这样，根据经典统计理论，线振子具有能量 $n\epsilon_0$ 的几率必为 $e^{-n\epsilon_0/KT}$ 。由此，线振子的平均能量 $\bar{\epsilon}$ ，将可由下式计算之

$$\bar{\epsilon} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n\epsilon_0 e^{-n\epsilon_0/KT}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\epsilon_0/KT}}$$

$$\therefore \sum_{n=0}^{\infty} n e^{-n\alpha} = -\frac{d}{d\alpha} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\alpha} = -\frac{d}{d\alpha} \frac{1}{1-e^{-\alpha}} = \frac{e^{-\alpha}}{(1-e^{-\alpha})^2}$$

代入上式：所以

$$\begin{aligned} \bar{\epsilon} &= \frac{\epsilon_0 e^{-\epsilon_0/KT}}{(1-e^{-\epsilon_0/KT})^2} \cdot (1-e^{-\epsilon_0/KT}) \\ &= \frac{\epsilon_0 e^{-\epsilon_0/KT}}{1-e^{-\epsilon_0/KT}} = \frac{\epsilon_0}{e^{\epsilon_0/KT} - 1} \end{aligned}$$

根据经典电磁理论的计算，在频率范围 $\nu \sim \nu + d\nu$ 间隔内，将共有  $\frac{8\pi\nu^2}{c^3} d\nu$  个本征振动①。因为每一本征振动的平均能量 $\bar{\epsilon}$ 为  $\frac{\epsilon_0}{e^{\epsilon_0/KT} - 1}$ ，故在该频率范围内所辐射的能量

$$d\nu \text{ 必为: } d\nu = \rho\nu d\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \cdot \frac{\epsilon_0}{e^{\epsilon_0/KT} - 1} d\nu \quad (1-4)$$

比较(1-3)与(1-4)两式，为了要使理论的推导能与实验的结果完全很好



的符合。則綫振子所能具有的最小能量 $\varepsilon_0$ ，必等于

$$\varepsilon = h\nu$$

(1-5)

上式中 $h$ 称为普朗克常數，它在近代物理中佔有重要的地位。

$$h = 6.53 \times 10^{-27} \text{ 尔格} \cdot \text{秒}$$

这一常數，在宏观領域內是不存在的。

根据經典能量均分定律的概念

$$\bar{\varepsilon} = kT$$

根据普朗克假設

$$\bar{\varepsilon} = \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1}$$

也就是說，根据普朗克的假定，平均能量将随着頻率的增加而減小。

在普朗克的假設中，能量已不一定是連續的了，而是具有分立的、量子化的數值。这些都表示出，普朗克假設与經典理論之間，有着深刻的矛盾。因之量子概念的提出，表征着在物理的发展上，是进入了一个新的紀元。

## §2 光的量子本性

### 2-1: 光电效应:

所謂光电效应，即在光的作用下，电子从金属物体表面逸出的現象。

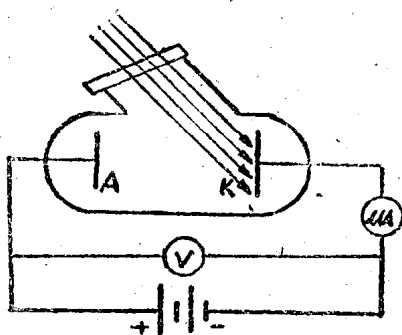


图1-2 光电效应实验装置

依据图1-2的装置，在1888—1890年之間，A. Γ. 斯托列托夫，对光电效应作了詳尽的研究。对于光电效应的重要規律，我們可以总结如下：

(1) 光电子所具有的能量与入射光的强度无关，而只决定于光的頻率。

(2) 当投射到某一金属表面的光，当其頻率小于某一极限时，不論光的强度有多大，都不能产生光电子。

(3) 光电子的數目将与光的强度有关。

(4) 从光的照射，到光电子的产生，几乎不

需要時間，根据实验，这一時間将小于 $10^{-9}$ 秒。

为了要解釋上述的光电效应。爱因斯坦指出，假如把光看作是每個具有能量为 $h\nu$ 的光子流，也就是說采用純粹的粒子观点。将能很好的解釋以上光电效应的各項重要性質。

爱因斯坦指出，光子具有以下特性：

(1) 具有能量

$$\varepsilon = h\nu$$

(2) 静止質量为零

$$m_0 = 0$$

(3) 具有冲量

$$\vec{p} = \frac{h\nu}{c} = h/\lambda = h\vec{k} \quad \vec{k} = \text{波矢}$$

由于光子具有一定的冲量，当光子流遇到任何阻碍物时，必在此阻碍物上施加压力，如同气体分子在容器壁上的碰撞，形成气体的压力一样。卓越的俄罗斯物理学家 Л. Н. 列別捷夫的著名实验，肯定光压的压强，在數量上符合 $\vec{P} = \frac{h\nu}{C}$ 这一公式。

当引入了光子概念以后，对于光作用在任何体系上(金属表面上)，可以将其看作

“粒子的相互碰撞”。这时，能量守恒与冲量守恒定律，应确信仍然是正确的。

如果我们用 $\epsilon$ 和 $\vec{P}$ 来表示某体系在碰撞前的能量和冲量，又用 $\epsilon'$ 和 $\vec{P}'$ 来表示这体系在“碰撞”后的能量和冲量。其次用 $h\nu$ 和 $h\vec{K}$ 表示光子在“碰撞”前的能量和冲量，用 $h\nu'$ 和 $h\vec{K}'$ 表示光子在“碰撞”后的能量和冲量。则根据能量守恒与冲量守恒定律得：

$$\left. \begin{aligned} h\nu + \epsilon &= h\nu' + \epsilon' && \text{标量方程} \\ h\vec{K} + \vec{P} &= h\vec{K}' + \vec{P}' && \text{矢量方程} \end{aligned} \right\} \quad (2-1)$$

根据上述的基本概念，光投入在金属表面上，我们可将其看作光子与电子的相互“碰撞”。在此过程中，对(2-1)式的能量守恒定律可写为：

$$h\nu = \frac{1}{2}mv^2 + A \quad (2-2)$$

在碰撞的过程中，光子将其能量全部传给了电子。使电子克服逸出功 $A$ 后，逸出表面，并具有初动能 $\frac{1}{2}mv^2$ 。

根据(2-2)式，我们就能很容易地来解释光电效应的性质。由于(2-2)式所表示的是一直线方程，因之光电子的初动能 $\frac{1}{2}mv^2$ 将与频率 $\nu$ 成直线关系。投射光的频率愈高，则所产生的光电子的初动能就愈大。同时，我们看到，如果光电子的初动能为零，则得一临界频率 $\nu_0$ 。

$$\nu_0 = \frac{A}{h} \quad (2-3)$$

在 $\nu < \nu_0$ 的情况下，光电子的初动能将变为负值。亦即表示在这种情况下，将不会产生光电效应。再者，当投射光的强度愈强，则表示光子流内的光子数愈多，因之在发生碰撞后，产生了更多的光电子。

## 2-2 康普顿效应：

当伦琴射线，尤其是 $\gamma$ 射线散射时，发现波长有了改变，在散射的过程中产生了新的较长的波长，它的穿透能力较差。此即谓之康普顿散射。按照经典波动理论，散射机构是这样的，由于入射电磁场引起电子的振动，因此很自然的期待着散射辐射（电子受外场作用振动后所产生的辐射）的频率，必定与入射电磁场的频率相同。要解释散射后出现新的较长的波长，必须应用光子概念。亦即把入射的伦琴射线看作具有一定能量和一定冲量的微粒。

观察康普顿效应的实验装置如图：1-3所示。在实验中是以石墨作为散射物体，以一固定的 $M$ 的 $K$ 线作为入射伦琴射线，在不同的散射角 $\Phi$ ，观察在散射后不同波长的辐射强度，得其结果如图1-4所示。因之，对

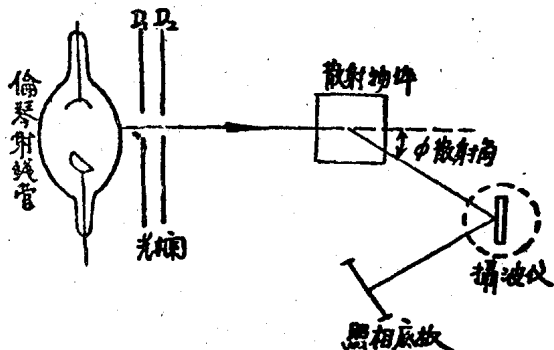


图1-3 观察康普顿效应的实验装置

石墨的康普頓散射，我們可以得到以下的特点：

(1) 在散射辐射中，存在着有原来激发辐射的波长，以及移向波长较长方面的一个新波长。

(2) 新波长增加的数值与散射角有关，它将随着散射角的增大而增大。

(3) 当散射角增大时，没有位移的谱线强度降低，而新的，有位移的谱线强度增强了。

现在让我们用光子概念来解释康普頓效应：首先我们把入射伦琴射线看作为具有一定能量和一定冲量的光子。伦琴射线对散射物体的作用可看作“碰撞”。在碰撞前，散射物体内的电子可以假定其为静止的，其冲量亦必为零。光子的起始冲量等于  $\frac{h\nu_0}{C}$ 。碰撞后电子获得冲量  $m\vec{v}$ ，此处  $m$  为电子的运动质量。碰撞后光子的冲量将变为  $\frac{h\nu}{C}$ 。

根据(2-1)式，对在上述碰撞过程中的能量守恒与冲量守恒定律，可以写为：

$$\left. \begin{aligned} h\nu_0 + m_0c^2 &= h\nu + \frac{m_0}{\sqrt{1-(v/c)^2}} \cdot C^2 \\ \frac{h\nu_0}{C} + 0 &= \frac{h\nu}{C} + \frac{m_0}{\sqrt{1-(v/c)^2}} \cdot \vec{v} \end{aligned} \right\} \quad (2-2)$$

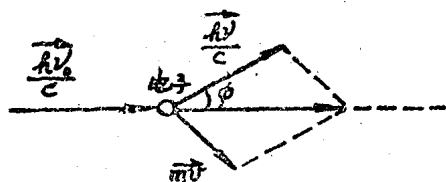


图1-5 在康普頓效应中的矢量图

为了计算，应以矢量在座标轴方向投影的两个标量方程来代替(2-2)式中的矢量方程。但是我们将不用这个方法来处理问题。首先我们将(2-2)式中的矢量方程画成如图1-5所示的矢量图。由余弦定律，我们立即能够确定  $mv$  的数值：

$$\frac{m_0^2}{1-(v/c)^2} V^2 = \frac{h^2\nu_0^2}{c^2} + \frac{h^2\nu^2}{c^2} - 2h^2 \frac{\nu_0\nu}{c^2} \cos\phi \quad (2-3)$$

这样(2-3)式将与(2-2)式中的标量方程构成了一对联立方程。在此联立方程中，由于  $m_0$ 、 $C$ 、 $h$ 、 $\nu_0$ 、 $\phi$  皆为已知数。故解此联立方程即能求得  $\nu$  与  $\nu_0$ 。解以上联立方程求得：

$$\nu = \frac{\nu_0}{1 + 2 \frac{h\nu_0}{m_0c^2} \sin^2 \frac{\phi}{2}} \quad (2-4)$$

从新产生的频率  $\nu$ ，我们即能很容易地求得新波长的位移  $\Delta\lambda$ 。因为

$$\begin{aligned} \Delta\lambda &= \lambda - \lambda_0 = \frac{c}{\nu} - \frac{c}{\nu_0} = c \left[ \frac{1}{\nu} - \frac{1}{\nu_0} \right] \\ &= c \left[ \frac{1 + 2 \frac{h\nu_0}{m_0c^2} \sin^2 \frac{\phi}{2}}{\nu_0} - \frac{1}{\nu_0} \right] \\ &= 2 \cdot \frac{h}{m_0c} \cdot \sin^2 \frac{\phi}{2} \end{aligned} \quad (2-5)$$

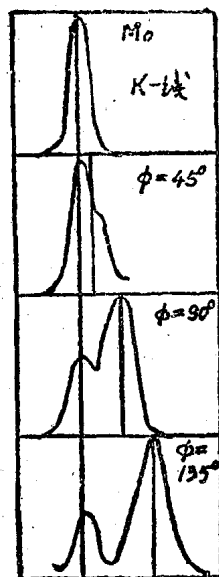


图1-4 石墨的康普頓效应

在(2-5)式中,量綱为长度的數量 $\frac{h}{m_0 c}$ 是三个普适常數的組合,它称为康普頓波长并用 $\Lambda$ 表示之:

$$\Lambda = \frac{h}{m_0 c} = \frac{6.624 \times 10^{-27}}{9 \times 10^{-28} \times 2.99 \times 10^{10}} = 0.0242 \text{Å}$$

最后我們得到,在散射中波长的位移 $\Delta \nu$ 为:

$$\Delta \lambda = 2 \Lambda \sin^2 \frac{\Phi}{2} = 0.048 \sin^2 \frac{\Phi}{2} \quad (2-6)$$

从这公式中我們看到,对于 $\Phi = 0$ , $\Delta \lambda = 0$ 。对于 $\Phi = 90^\circ$ , $\Delta \lambda = \Lambda$ 。最后对于 $\Phi = 180^\circ$ , $\Delta \lambda = 2 \Lambda$ ,因之 $\Delta \lambda$ 将随散射角 $\Phi$ 的加大而增加,这是很明显的。

(2-6)式的結果首先是由康普頓求得的。康普頓与吳有訓曾把他們的測量結果与(2-6)式所表示的理論推导相对比。他們得到了与理論完全符合的結果。所以康普頓吳有訓的實驗指出,光子冲量存在的假定是完全正确的。而且光子的冲量之值由

$$\vec{P} = \frac{\vec{k\nu}}{c} \text{ 所决定。}$$

最后,我們必須指出:在散射的过程中,电子所获得的能量 $E_k$ 必为,

$$E_k = h\nu_0 - h\nu = h\Delta \nu$$

因之,电子所获得的能量 $E_k$ 与入射光子能量的比值将等于:

$$\frac{E_k}{h\nu_0} = \frac{\Delta \nu}{\nu_0}$$

$$\text{由于 } \Delta \nu = \nu_0 - \nu = \frac{c}{\lambda_0} - \frac{c}{\lambda_0 + \Delta \lambda} = \frac{c}{\lambda_0} \cdot \frac{\Delta \lambda}{\lambda_0 + \Delta \lambda} = \nu_0 \frac{\Delta \lambda}{\lambda_0 + \Delta \lambda}$$

$$\therefore \frac{E_k}{h\nu_0} = \frac{\Delta \nu}{\nu_0} = \frac{\Delta \lambda}{\lambda_0 + \Delta \lambda}$$

应用(2-6)式的关系,我們得:

$$\frac{E_k}{h\nu_0} = \frac{2 \Lambda \sin^2 \frac{\Phi}{2}}{\lambda_0 + 2 \Lambda \sin^2 \frac{\Phi}{2}} \quad (2-7)$$

从(2-7)式,我們能够計算入射光子的能量将有多少为电子所获得。在散射角 $\phi = 90^\circ$ 时,如入射的为硬倫琴射綫,其波长 $\lambda = 10 \Lambda = 0.24 \text{Å}$ ,則此时 $\frac{E_k}{h\nu_0}$ 将等于 $\frac{1}{11}$ 。但在同样散射角情况下只是入射倫琴射綫的波长 $\lambda_0 = \Lambda = 0.024 \text{Å}$ ,則此时 $\frac{E_k}{h\nu_0}$ 将等于 $\frac{1}{2}$ 。由此可見,入射倫琴射綫的波长愈短,則每一光子所具有的能量就愈大。根据(2-7)式的計算,入射倫琴射綫的波长愈短,則电子将从光子那里获得其全部能量的較大部分。反之,入射倫琴射綫的波长愈长,則电子只将从光子那里获得其全部能量的較小部分。

### 2-3: 光的两重性

在光的干涉与衍射实验中,我們可以根据波的概念来描敘。在光电效应康普頓效

应等实验中，对于这一部分现象，我们可以根据粒子的概念来描述。我们必须着重指出：只用波的概念，或只用粒子的概念，都不能描述和解释光的全部现象和行为。

因之，我们可以得出这样的结论：光不是波，也不是粒子的集合。它是更加复杂的，把波动性和粒子性统一于其中的一个客体。光子按粒子性定律辐射和吸收，而按波动性的定律来传播。表示其粒子性的，我们用能量 $\epsilon$ 与冲量 $\vec{p}$ 。表示其波动性的，我们用频率 $\nu$ 与波长 $\lambda$ （或波矢 $\vec{k}$ ）。波动性与粒子性是同一客体的属性，因之波动性与粒子性之间的关系，由下式表示之：

$$\left. \begin{aligned} \epsilon &= h\nu \\ \vec{p} &= \hbar \vec{k} \end{aligned} \right\} \quad (2-8)$$

根据光的电磁理论，在空间某点的平均能量密度 $\bar{\epsilon}$ 必为：

$$\bar{\epsilon} = \frac{1}{16\pi} (E_0^2 + H_0^2)$$

上式中 $E_0$ 、 $H_0$ 分别为电场强度与磁场强度的最大值。从光子的基本概念得知，在 $\bar{\epsilon}$ 愈大的那些地方，光子数也就愈多。由于一个光子的能量等于 $h\nu$ ，因此在单位体积内的量子数 $n$ 必为：

$$n = \frac{1}{16\pi} \cdot \frac{(E_0^2 + H_0^2)}{h\nu} \quad (2-9)$$

(2-9)这个式子，就是这样，把波的概念和粒子的概念联系起来。由该式，我们更进一步可以明显的看到，假如某处的场较强，则在该处发现光子的几率就愈大。在场较弱的地方，发现光子的几率就愈小。在这里的几率，应该理解为，在所选定的体积元内发现的光子数与全部空间光子总数之比。

最后，根据(2-9)式，我们必须着重指出：在单位体积内发现光子的几率，必与波的振幅的平方成比例。

### § 3 原子性

在微观领域内，我们所遇到的是一系列的基本粒子。这些基本粒子是电子、质子、中子、正电子。同样，光子与微中子也是基本粒子。近几年来又发现了介子。同一类基本粒子的每一个的质量、电荷，以及其他性质都是相同的，不能被改变。

原子性是微观领域内的一个基本特性。不仅基本粒子具有原子性，而且由基本粒子所组成的复合粒子，例如原子、分子、原子核等也都具有原子性。

这种原子性是由以下两种情况所引起的：

(1) 每种复合粒子是完全由确定的基本粒子所组成的。

(2) 复合粒子的态是不连续的。

在微观领域中，复合粒子只能处于不连续态这一事实，可由弗兰克与赫芝实验及原子光谱中明显的看出。

### 3—1· 佛兰克与赫芝实验:

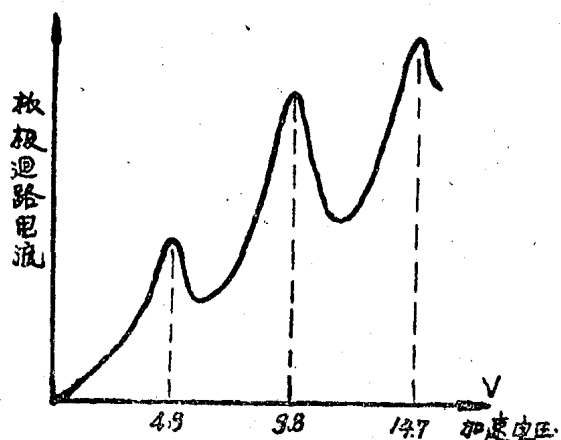


图 1—6 佛兰克与赫芝实验示意图

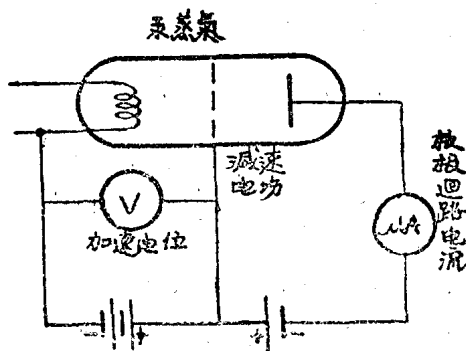


图 1—7 兰克佛与赫芝实验的结果

佛兰克与赫芝实验的装置如图 1—6 所示，由阴极灼热发射出来的电子，经过阴极与栅极间加速电位的加速，便获得了一定的速度，亦即获得了一定的动能。此时电子所获得的动能必为： $\text{电子所获得的动能} = V \text{ 电子伏}$ ，上式中  $V$  为使电子加速的加速电位。

板极电位略低于栅极电位，因之对电子来讲，在栅极与板极间存在着减速电场。在阴极与栅极间的加速电位小于 4.9 伏时，电子由于加速所获得的动能必小于 4.9 电子伏。当其于汞 (Hg) 蒸气的假电子发生碰撞时，并不交换能量。也就是说并不把能量传送给汞的假电子。此时由阴极发射出来的电子，是具有足够大的动能，来克服栅极与板极间的减速电场，使其能到达板极。因之在加速电位小于 4.9 伏范围内，随着加速电位的增加，板极回路内的电流亦将如图 1—7 所示随着增加。

待栅极与阴极间加速电位增加到 4.9 伏时，发现板极回路电流迅速下降。这即表示，由阴极发射出来的电子，经过加速，获得 4.9 电子伏的能量。在与汞的假电子碰撞时，与其交换了能量。也就是说将其所具有的能量，传送给汞的假电子。因之此时，由阴极发射出来的电子，由于损失了能量，不能克服栅极与板极间的减速电场。因之不能再到达板极，所以板极回路内的电流即迅速下降。

实验的全部结果，如图 1—7 所示。实验指出，在加速电位为 9.8 伏时，板极回路电流再次迅速下降。从而可以看到，由阴极发射出来的电子，经过加速后，获得 9.8 电子伏的能量。当其相继二次与二个汞原子的假电子相碰撞后，损失了能量。因之不能到达板极，致使板极回路内电流，又再次迅速下降。

佛兰克与赫芝实验充分表明：汞原子内的假电子，只能处于不连续的状态。汞原子中，第一激发态的能量，将比基态大 4.9 电子伏。

### 3—2 原子光谱

在上半世纪的下半期，就已经肯定：原子发射的是线光谱，而分子发射的是带光谱。

特别是在氢原子所发射的光谱中，发现了五个不同的光谱系。每一系都由若干条谱

綫組成。由實驗結果得知，對於氫原子的這五個光譜系，可用以下的統一公式表示之：

$$\text{波數} = \nu = R \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (3-1)$$

上式中的 $\nu$ 表示波數。它表示在單位長度內，所包含的波長數。

$$\therefore \text{波數 } \nu = \frac{1}{\lambda} \quad (3-2)$$

|            |         |                   |
|------------|---------|-------------------|
| (1) 在賴曼系中  | $m = 1$ | $n = 2, 3, \dots$ |
| (2) 在巴耳末系中 | $m = 2$ | $n = 3, 4, \dots$ |
| (3) 在帕邢系中  | $m = 3$ | $n = 4, 5, \dots$ |
| (4) 在布喇開系中 | $m = 4$ | $n = 5, 6, \dots$ |
| (5) 在蓬德系中  | $m = 5$ | $n = 6, 7, \dots$ |

在(3-1)式中， $R$ 為一常數。稱為里德堡常數。根據精確的實驗結果得：

$$R = 10977.581 \text{ 厘米}^{-1} \quad (3-3)$$

對於(3-1)式，我們可以將其寫為二個整數函數之差：

$$\nu = T(m) - T(n) \quad (3-4)$$

數字 $T(m)$ 、 $T(n)$ 稱為光譜項。對氫原子，所有各系的光譜項，都能表為：

$$T(m) = \frac{R}{m^2} \quad (3-5)$$

上式中 $m$ 可取自1開始的一系列整數。

波數與頻率之間的关系是簡單的，可表為：

$$\text{頻率} = \text{光速} \times \text{波數} \quad (3-6)$$

根據§2所闡述的關於光子的基本概念，我們已知，對於輻射及吸收應該用粒子概念來描述。如果對(3-4)式的兩邊，都乘以光速 $C$ 及普朗克常數 $h$ ，則得：

$$h\nu = chT(m) - chT(n) \quad (3-6)$$

應該特別注意，在(3-6)式中， $\nu$ 表示輻射的頻率（而不是波數）。根據光子的基本概念， $h\nu$ 為每個輻射光子所具有的能量。所以(3-6)式的右邊，亦必代表兩個能量之差。這樣(3-6)式可進一步表為： $h\nu = \epsilon_{\text{初}} - \epsilon_{\text{終}}$  (3-7)

由氫原子，我們可以完全肯定。氫原子輻射的頻率有完全肯定的數值。這就推論到：氫原子在輻射之後，一定處於具有一定能量的態中。輻射的過程必將與兩個態相聯系。而非常明顯的，這兩個態是不連續的。否則的話，如果氫原子可以處於連續的態中，那末它所輻射的光譜就將不是綫光譜。最後必須再着重指出。由氫原子的綫光譜這一事實出發，完全肯定了氫原子只能處於一系列的不連續的態中。

在微觀領域內，基本粒子處於不連續的態。這是與經典概念完全相矛盾的。

## §4 波爾理論

從盧瑟福的“ $\alpha$ 粒子通過金葉的散射”實驗，完全肯定了原子結構的模型。但是根據經典理論，不能解釋在原子中，電子繞核旋轉是處於穩定狀態。

為了解決以上的困難，在光子假設、普朗克假設、以及其他有關基本粒子原子性

实验结果的基础上。1912年玻尔提出了关于原子理论的两个基本原理。这两个基本原理是：稳定状态的存在、及辐射的频率条件。

(1) 第一：原子仅能长久地处于一定的状态——定态——在这些状态中，虽有带电粒子的加速度运动，但不辐射也不吸收能量。在上述这些状态中，原子所具有的能量组成分立的系列：

$$\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3, \dots, \varepsilon_n$$

这些状态的特征是它们本身的稳定性。由于吸收和辐射电磁波的结果（或由于碰撞的结果）。原子状态的改变，只能从这些状态中的任一个转变到这些状态中的另一个。由此可见，原子状态的变化，是跳跃式进行的。

(2) 第二：在从一个定态过渡到另一个定态的过程中，原子辐射（或吸收）是严格地一定频率的辐射。在从定态  $\varepsilon_n$  过渡到定态  $\varepsilon_m$  ( $\varepsilon_n > \varepsilon_m$ )，所辐射出来的，或从定态  $\varepsilon_m$  过渡到定态  $\varepsilon_n$  ( $\varepsilon_n > \varepsilon_m$ ) 所吸收的，只是单色性的辐射。其频率  $\nu$  由下式决定之：

$$\nu = \frac{\varepsilon_n - \varepsilon_m}{h} \quad (4-1)$$

(4-1) 式称为玻尔频率条件。h 为普朗克常数。

以上这两个假设，是尖锐地与经典理论相矛盾。根据第一个假设，原子内电子绕核旋转，有向心的加速度，但不能辐射能量。根据第二个假设，辐射的频率与电子的运动周期完全无关。总的来说，辐射的产生不是由于带电微粒在作加速运动，而是由于原子状态的突然改变。

从以上两个基本假设出发，首先必须将普朗克对谐振子的量子假设予以合理的推广和普适化。再应用来处理原子结构问题。

如果  $q$  表示广义坐标， $\vec{P}$  表示与该广义坐标相对应的广义冲量。则对于一个自由度的任何系统的普适性量子条件可表为

$$\oint \vec{P} d\vec{q} = nh \quad (4-2)$$

$n = 1, 2, 3, \dots$

现在让我们来讨论一个最简单的氢原子模型。将 (4-2) 式所表示的普适的量子条件应用到我们的氢原子模型上去，一个电子沿圆周轨道绕核旋转着。圆周轨道的半径为  $r$ 。此处作为坐标，适宜于选择表征电子在轨道上位置的极坐标  $\phi$ 。相对应的广义冲量将为动量矩  $P_\phi = mr^2 \dot{\phi}$ 。我们以  $\phi$  和  $P_\phi$  代入 (4-2) 式，并注意到在圆周运动中， $P_\phi$  为一常数（动量矩守恒）。那么我们得到：

$$nh = \oint P_\phi dq = \int_0^{2\pi} P_\phi d\phi = P_\phi \int_0^{2\pi} d\phi = 2\pi P_\phi$$

$$\text{由此即得} \quad P_\phi = n \frac{h}{2\pi} \quad (4-3)$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

上式中的  $n$  称为量子数。

从 (4-3) 式我们看到，根据普适的量子条件。电子绕核旋转，只有那些动量矩  $P_\phi$  为  $\frac{h}{2\pi}$  整数倍的那些轨道运动，才是存在的。由于量子数  $n$  是一系列的正整数，所



以电子的动量矩是分立的，是不連續的。这就充分表明了电子繞核旋轉只能处于不連續的态中。

如图 1-8 所示，在电子圍繞电荷为  $Ze$  的核作圓周运动时。为了使运动軌道保持不变，則离心力必等于庫仑吸力。这样：

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{Ze^2}{r^2} \quad (\text{經典概念}) \quad (4-4)$$

再根据 (4-3) 式的量子条件来选择动量矩得：

$$mUr = n \frac{h}{2\pi} \quad (\text{量子条件}) \quad (4-5)$$

从 (4-4) 与 (4-5) 这一对联立方程，我們解得：

$$\begin{cases} r_n = \frac{n^2 h^2}{4\pi^2 Ze^2 m} \\ v_n = \frac{2\pi Ze^2}{nh} \end{cases} \quad (4-6)$$

因为电子的总能量必为其动能与位能之和：

$$\therefore \text{电子总能量} = \varepsilon = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{Ze^2}{r} = \frac{1}{2} \frac{Ze^2}{r} - \frac{Ze^2}{r}$$

$$\therefore \varepsilon = -\frac{Ze^2}{2r} \quad (4-7)$$

将 (4-6) 式中的  $r_n$  代入 (4-7) 式得：

$$\varepsilon_n = -\frac{2\pi^2 Z^2 e^4 m}{n^2 h^2} \quad (4-8)$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

因之可見，原子的基态具有最小的能量，相当于  $n=1$ ，这亦相当于最大的速度和最小的軌道半径。简单的計算給出：对于氢原子  $z=1$ 。我們得： $r_1 = 0.5 \times 10^{-8}$  厘米 = 玻尔半径

$$v_1 = 2.2 \times 10^8 \text{ 厘米/秒}$$

$$\varepsilon_1 = -0.22 \times 10^{-10} \text{ 尔格} = -13.6 \text{ 电子伏}$$

根据玻尔的第二个假设，原子从定态  $\varepsilon_n$  过渡到定态  $\varepsilon_m$  时 ( $\varepsilon_n > \varepsilon_m$ )，是伴随着光子的辐射，其频率必为：

$$\nu = \frac{2\pi^2 Z^2 e^4 m}{h^3} \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

如将上式与 (3-1) 式相比較，即得：

$$\frac{2\pi^2 Z^2 e^4 m}{h^3 c} = \text{里德堡常数 } R \quad (4-9)$$

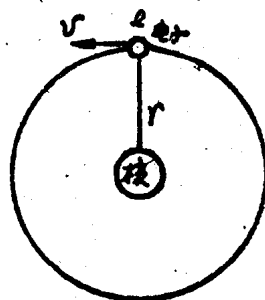


图 1-8 作圓周軌道运动的氢原子模型